

Evaluación del factor de aceptabilidad ambiental como criterio de idoneidad en las prácticas de Química Orgánica

Irma C. Gavilán-García,* J. Gustavo Ávila-Zárraga, Nadya I. Birrichaga-Bonilla
y G. Susana Cano Díaz

ABSTRACT (Environmental acceptability factor assessment as suitability criteria in organic chemistry experiments)

Teaching Organic Chemistry based on sustainability is a goal that goes beyond a subject in the curriculum of the career of Chemistry. Not just about playing techniques, but to promote a change of perspective in the teaching-learning process. We propose to study an isomerization reaction, an issue that is part of the core courses in Organic Chemistry, in which, during their experimental work, students must learn to judge the suitability of a chemical transformation, for which they must evaluate a number of parameters such as performance efficiency and environmental acceptability factor. The objective of this work is the study of different synthetic routes from a new approach, which allows students to judge the suitability of each route, using the production of fumaric acid as a model.

KEYWORDS: environmental factor, fumaric acid, isomerization, organic chemistry

RESUMEN

Enseñar química orgánica basada en la sustentabilidad es un objetivo que va más allá de una asignatura más en el currículo de la carrera de Química. No solo se trata de reproducir técnicas, sino de propiciar un cambio de perspectiva en el proceso enseñanza y aprendizaje. Se propone estudiar una reacción de isomerización, tema que forma parte de los cursos básicos de Química Orgánica, en el cual los estudiantes durante su trabajo experimental deben aprender a juzgar la idoneidad de una transformación química, para lo cual deben evaluar una serie de parámetros entre los cuales están la eficiencia en el rendimiento y el factor de aceptabilidad ambiental. El objetivo del trabajo es el estudio de diferentes opciones de rutas sintéticas desde un nuevo enfoque, que permita al estudiante juzgar la idoneidad de cada ruta, usando como modelo la obtención de ácido fumárico.

Palabras clave: factor de aceptabilidad ambiental, ácido fumárico, isomerización, química orgánica

Introducción

Actualmente, el estudio de la Química Orgánica no puede quedar exenta de abordar los aspectos asociados al cuidado del ambiente (Mansilla *et al.*, 2014; Ávila *et al.*, 2011). El estudiante de la carrera de Química considera la Química Orgánica como una parte de la Química necesaria para el desarrollo de la sociedad actual. Sin embargo, debe entender que la nueva misión de la Química Orgánica es “estar comprometida con el medio ambiente” y ser capaz de compatibilizar el

desarrollo económico e industrial con el desarrollo sostenible (Reyes, 2012; Vucentich y Nelson, 2010).

Es imprescindible un cambio de enfoque de la enseñanza de la Química Orgánica (Ávila *et al.*, 2010 a y b), sustituyendo el viejo objetivo que por muchos años se centró en sintetizar compuestos con rendimientos y purezas elevadas a partir de las materias primas disponibles, por la nueva visión de formar químicos que trabajen en el desarrollo de procesos y materiales sustentables, fomentando con esto una conciencia ambiental que los encamine a ser profesionales y ciudadanos con un alto grado de responsabilidad en este aspecto (Nudelman, 2004; Garritz y Urzúa, 2008).

Justificación

Durante su trabajo experimental los estudiantes deben aprender a juzgar la idoneidad de una transformación química, evaluando una serie de parámetros ambientales tales

*Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, Ciudad Universitaria 04510, Coyoacán, México D.F. Tel: +52 (55) 5622 3745. Correo electrónico: irmac@unam.mx

Fecha de recepción: 10 de marzo de 2014.

Fecha de aceptación: 19 de agosto de 2014.

(1) como: residuos generados, gasto energético, toxicidad y eficiencia, aspectos que son críticos en un proceso industrial y que deben ser evaluados para aceptar la viabilidad (Dicks, 2012; Garritz, 2009; Mestres, 2003).

No obstante, cuando se analizan los textos y/o manuales que tradicionalmente han sido utilizados en los cursos de Química Orgánica, se detecta la ausencia del elemento ambiental en la sección experimental, lo cual no contribuye a lograr el proceso de enseñanza y aprendizaje como lo señala Onrubia (2005).

Así, podría señalarse que en general:

- No se enfatiza la evaluación de la economía atómica teórica y economía atómica experimental.
- No se da la importancia a la evaluación de la eficiencia de masas de la ruta sintética seleccionada.
- Ningún manual de prácticas de Química Orgánica incluye la evaluación del factor de aceptabilidad ambiental en cada experimento.
- Los manuales de prácticas de laboratorio suelen obviar la importancia de proponer diferentes rutas sintéticas para un mismo producto, de manera que los estudiantes puedan hacer una comparación de los aspectos inherentes a la dimensión ambiental de cada uno y estar conscientes de las consecuencias de optar por cada uno.
- Los textos de Química Orgánica no incluyen todavía ningún capítulo referente a Química Sustentable.

Para superar estas carencias se podrían proponer diversos tipos de acciones, aunque este trabajo se limita únicamente a la posibilidad de la inserción del componente ambiental en las prácticas de Química Orgánica.

El objetivo general de este trabajo es efectuar y analizar diferentes opciones de rutas sintéticas desde un nuevo enfoque que permita al estudiante juzgar la idoneidad de cada ruta, usando como modelo la obtención de ácido fumárico.

Asimismo, pretendemos que al desarrollar su trabajo experimental el alumno dé respuesta a las siguientes interrogantes: ¿qué grado de toxicidad tienen las materias primas?, ¿las materias primas provienen de recursos renovables?, ¿el experimento genera subproductos tóxicos que pueden evitarse?, ¿qué cantidad de residuos se generan?, ¿la reacción mantiene eficiencia tanto de masa como energética?, ante diferentes opciones para obtener el mismo producto, ¿qué criterio tomar en cuenta para seleccionar la más idónea?

Metodología

- Se seleccionó para nuestro estudio una reacción de isomerización, tema que forma parte de los cursos básicos de Química Orgánica, específicamente de la síntesis de ácido fumárico a partir de anhídrido o isomerización de ácido maléico. Se trata de la hidrólisis de un anhídrido en medio ácido para dar el diácido *cis*, éste se isomeriza posteriormente obteniéndose el diácido *trans* (Ávila *et al.*, 2009).

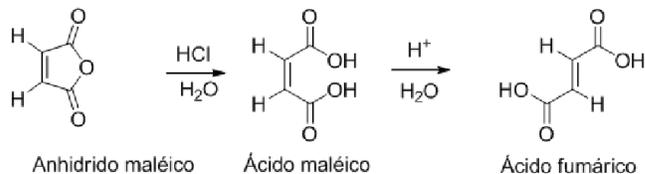


Figura 1. Ruta tradicional de obtención de ácido fumárico.

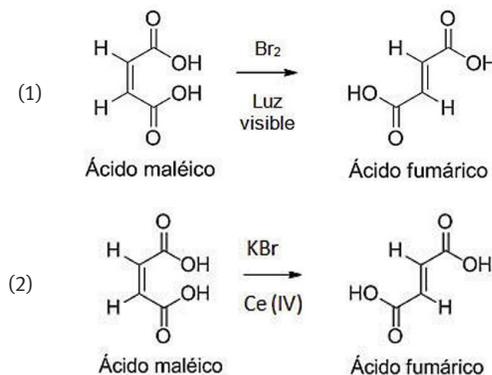


Figura 2. Rutas alternativas (1) y (2) de obtención de ácido fumárico.

- Se seleccionaron tres diferentes técnicas alternativas para la obtención de ácido fumárico, las cuales serían evaluadas experimentalmente por los estudiantes (figuras 1 y 2).

El procedimiento experimental se resume en la tabla 1 (Ávila, *et al.*, 2009; Jwo, 1981; Keusch, 2013).

Para cada alternativa el estudiante debe calcular los siguientes factores (Ávila, *et al.*, 2011; Sheldon, 2007; McKenzie, *et al.*, 2005):

- a) *Economía atómica teórica*: Es la medición intrínseca de cantidad de átomos pertenecientes a las materias primas que terminan formando parte del producto deseado en una transformación química. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ Economía atómica teórica} = \frac{\text{PM del producto}}{\text{PM de todos los reactivos}} \times 100$$

- b) *Economía atómica experimental*: La economía experimental está, por lo tanto, basada en la cantidad real de reactivos usados en una síntesis experimental. El valor deseable en este parámetro es de 100.

$$\% \text{ Economía atómica exp.} = \frac{\text{Rendimiento teórico}}{\text{Masa total de los reactivos}} \times 100$$

- c) *Eficiencia de masas*: Es la relación de la masa del producto deseado respecto a la masa total de entrada. El valor deseable para este parámetro es 1.

$$\text{Eficiencia de masas} = \frac{\text{Masa del producto deseado}}{\text{Suma de masas de entrada}}$$

- d) *Factor de aceptabilidad ambiental (E)*: Se enfoca en el problema de generación de residuos en las técnicas experimentales, lo cual impulsa el desarrollo de procesos más

Tabla 1. Procedimiento experimental de cada ruta sintética del ácido fumárico.

<i>Ruta tradicional</i>	<i>Ruta alternativa 1 (Br₂/Luz)</i>	<i>Ruta alternativa 2 (KBr/CeIV)</i>
1. En un matraz de bola de 50 mL colocar 1 g de anhídrido maléico y disolver en 2 mL de agua caliente. Después se agregan poco a poco 2.5 mL de ácido clorhídrico concentrado.	1. Pesar 3.75 g de ácido maléico y agregar lentamente 5 mL de agua destilada hasta disolver.	1. En un matraz aforado de 25 mL colocar 0.20 g de nitrato cérico amoniacal, 0.15 g de KBr y 1.45g de ácido maléico.
2. Colocar el refrigerante en posición de reflujo y caliente a ebullición con agitación 20 minutos. Los cristales de ácido fumárico se formarán en el seno de la reacción.	2. En un matraz bola de 25 mL colocar 5 mL de la solución de ácido maléico. Agregar lentamente 4 gotas de bromo.	2. Llevar al aforo con ácido sulfúrico 1 N, agregándolo lentamente dentro del matraz aforado.
3. Al término del reflujo enfriar el matraz con agua y filtrar al vacío.	3. Exponer el matraz a la luz solar, hasta la aparición de cristales	3. Vertir la solución en un matraz Erlenmeyer de 25 mL y agitar durante 20 minutos.
4. Pesar, purificar y obtener el rendimiento del producto.	4. Detener la reacción cuando no se observe más la formación de cristales.	4. Dejar en reposo la mezcla de reacción por 10-16 horas para aumentar el rendimiento.
5. Determinar punto de fusión e IR.	5. Pesar, purificar y obtener el rendimiento del producto. Determinar punto de fusión e IR.	5. Pesar, purificar y obtener el rendimiento del producto. Determinar punto de fusión e IR.

limpios y menos dañinos. Es la medida de la masa de residuos por kilogramo de producto deseado en una reacción, por lo que el valor deseable para este parámetro es 0.

$$E = \frac{\text{g de residuo}}{\text{g de producto}}$$

Resultados y discusión

Una vez seleccionada la reacción a estudiar por diferentes rutas, los docentes nos dimos a la tarea de probarlas en el laboratorio con el objetivo de obtener los parámetros de efi-

ciencia y el factor de aceptabilidad ambiental.

Con los resultados obtenidos para las diferentes alternativas de síntesis del ácido fumárico se pudo comprobar que al llevar al aula dicha metodología, los estudiantes podrían tener elementos objetivos, como son los parámetros evaluados, para determinar la idoneidad de cada ruta.

En las tablas 2, 3 y 4 se analizar los resultados por la obtención de ácido fumárico por diferentes alternativas.

Para cada ruta se comprobó la obtención del producto deseado mediante punto de fusión, cromatoplaca, espectro de infrarrojo y pruebas de solubilidad.

Tabla 2. Fuente catalítica: HCl concentrado.

# de experimento	Economía atómica teórica (%)	Economía atómica experimental (%)	Rendimiento teórico (g)	Rendimiento producto crudo (%)	Σ masas de entrada (g)	Eficiencia de masas (producto crudo)	Factor de aceptabilidad ambiental
1	100	19.9	1.187	85.8	5.9	0.2	3.1
2	100	19.9	1.192	81.3	5.9	0.2	3.1
3	100	19.9	1.192	81.1	5.9	0.2	3.4

Tabla 3. Fuente catalítica: Br₂ (usando luz solar: 250-300 luxes).

# de experimento	Economía atómica teórica (%)	Economía atómica experimental (%)	Rendimiento teórico (g)	Rendimiento producto crudo (%)	Σ masas de entrada (g)	Eficiencia de masas	Factor de aceptabilidad ambiental
1	100	42	3.8	88.4	8.85	0.4	0.9
2	100	42	3.8	93.4	8.85	0.4	1.0
3	100	42	3.8	97.3	8.85	0.4	0.7

Tabla 4. Fuente catalítica: Br₂ (usando Ce(IV)).

# de experimento	Economía atómica teórica (%)	Economía atómica experimental (%)	Rendimiento teórico (g)	Rendimiento producto crudo (%)	Σ masas de entrada (g)	Eficiencia de masas	Factor de aceptabilidad ambiental
1	100	100	1.5	79.8	24.8	0.05	19.3
2	100	100	1.5	84.1	24.8	0.05	16.7
3	100	100	1.5	80.1	24.8	0.05	16.9

Tabla 5. Resumen de los resultados.

	<i>Ruta tradicional</i>	<i>Ruta alternativa 1 (Br₂/Luz)</i>	<i>Ruta alternativa 2 (KBr/CeIV)</i>
Economía atómica teórica (%)	100	100	100
Economía atómica experimental (%)	19.9	42	100
Rendimiento (%)	82.7	97.3	81.3
Eficiencia de masas	0.2	0.4	0.05
Factor de aceptabilidad ambiental	3.2	0.9	17.6

En el caso de la economía atómica experimental, entendida como la eficiencia inherente a cada reacción, la opción más eficiente —como se muestra en la tabla 5—, corresponde a la ruta alternativa 2, que alcanza un 100%.

En lo que respecta al porcentaje de rendimiento, la mejor opción corresponde a la ruta alternativa 1, en la cual se usa luz solar, como se muestra en la misma tabla.

De los resultados de eficiencia de masas, el valor destacable es el de 0.05 que le corresponde a la técnica alternativa 2. Su bajo valor nos indica que es la técnica menos eficiente de las tres. El valor más alto obtenido en este parámetro fue para la alternativa 1 y el cual es de 0.4 (considerando que el valor máximo de este factor es 1).

Entendiendo que del cálculo al factor de aceptabilidad ambiental podemos identificar qué tan limpia es una reacción basándose en la cantidad de residuos. De acuerdo con nuestro estudio la técnica menos limpia es la alternativa 2, la cual tiene un valor de 17.6 g de residuo por gramo de producto, que es el más alto de las rutas probadas. La alternativa 1 es la que presenta el factor de aceptabilidad ambiental más bajo, con un valor de 0.9.

A pesar de que en la alternativa 1 se utilizan cuidadosamente 4 gotas de bromo, el cual es una sustancia corrosiva, presenta el mejor factor de aceptabilidad ambiental (0.9), la mayor eficiencia de masas (0.4) y el mejor rendimiento (97.3). Además, en esta ruta se aprovecha la luz solar, que es una fuente de energía renovable.

Como lo muestran los resultados, la obtención de ácido fumárico es un experimento que, llevado al laboratorio, permite al estudiante comparar diferentes rutas mediante la evaluación de parámetros como la economía atómica, eficiencia de masas y aceptabilidad ambiental.

Con este enfoque, los estudiantes dieron respuesta a las interrogantes planteadas:

¿Cuál es la ruta de mejor economía atómica?

En el caso de la economía atómica experimental, la mejor ruta es la ruta alternativa 2, con un 100%.

¿Cuál presenta la mejor eficiencia de masas?

Es la ruta alternativa 1, con 0.4 que es la que más se acerca al ideal, el cual es 1.

¿Cuál ruta genera más residuos?

La ruta alternativa 2, ya que genera 17.6 g de residuo por gramo del producto.

¿La reacción mantiene eficiencia tanto de masa como energética?
La eficiencia de masas no es mayor que 0.5 en ninguna de las rutas, así que no se presenta una eficiencia elevada.

Ante las diferentes opciones para obtener el ácido fumárico, ¿cuál es la idónea?

La ruta alternativa 1, ya que presenta el factor de aceptabilidad ambiental más bajo (E = 0.9), la eficiencia de masas más cercana a 1 (0.4) y el promedio de rendimientos más cercanos a 100% (97.3%).

Conclusiones

El ejemplo expuesto del estudio de la reacción de isomerización es una muestra que indica cómo se pueden realizar experimentos en el laboratorio donde los estudiantes, ante varios métodos de síntesis, pueden juzgar la idoneidad de cada uno de ellos, al tiempo que aprenden y explican los mecanismos de reacción fundamentales. Podemos asegurar que, al introducir en el aula este tipo de enfoques, se va familiarizando al alumnado con el tema ambiental, lejos del carácter abstracto que en ocasiones presenta la enseñanza de la Química Orgánica.

Aunque en un principio proponer todo un curso experimental con este enfoque requiere por parte del docente de mucho trabajo previo, este hecho no debe ser un inconveniente, ya que los resultados pueden fomentar en los estudiantes capacidades y habilidades de gran valor.

Los autores hemos valorado como altamente satisfactoria la experiencia de implementar el estudio de la obtención de ácido fumárico en el curso experimental de Química Orgánica. Al presentar tres alternativas para obtener el mismo producto, la mayoría de los estudiantes tomaron como reto encontrar la denominada “ruta idónea”, lo que se demostró en las opiniones expresadas por ellos. Asimismo, la mayoría comentó que les gustaría tener más experimentos con este enfoque, destacando la relevancia de evaluar parámetros como la economía atómica teórica y experimental, eficiencia de masas y el factor de aceptabilidad ambiental.

Es importante reconocer que la enseñanza experimental sigue planteando grandes oportunidades y retos para el docente, ya que implica ser capaces de generar, en los futuros químicos y a través de proyectos educativos *ad hoc*, conocimientos, creatividad y capacidad de análisis. Esto implica impartir y recibir una formación educativa de calidad, plena de valores y basadas en el análisis cotidiano de la necesidad de hacer realidad una Química Sustentable.

Referencias

- Ávila, G., Gavilán, I., Cano, S., La química verde en la industria: ejemplos para el aula, *Latin American Yearly Journal on Chemical Education*, **25**, 285-290, 2010a.
- Ávila, G., Gavilán, I., Cano, S., Obtención de alquenos aplicando los principios de la química verde, *Educación Química*, **21**(2), 183, 2010b.
- Ávila, G., Gavilán, I., Cano, S., *Teoría y experimentos de Química Orgánica con un enfoque de Química Verde*. México: UNAM, 2011.
- Ávila, G., García, C., Gavilán, I., León, Méndez, J., Pérez, G., Rodríguez, M., Salazar, G., Sánchez, A., Santos, E., Soto, M., *Química Orgánica experimentos con un enfoque ecológico*. México: UNAM, 2009.
- Dicks, A., *Green Organic Chemistry in lecture and laboratory*. EUA: CRC Press, 2012.
- Garritz, A., Urzúa, M., Evaluación de competencias en el nivel universitario, *Ideas CONCYTEG*, **39**, 138-154, 2008.
- Garritz, A., Química verde y reducción de riesgos, *Educación Química*, **20**(4), 394-397, 2009.
- Jwo, J-J., Bromine catalized isomerization of maleic acid to fumárico acid, *J. Chinese Chem. Soc.*, **28**, 35-41, 1981.
- Keusch, P., *Cis/trans Isomerization of maleic acid*, Organic Chemistry demonstration Experiments on Video Chemistry Visualized. Consultados por última vez en septiembre del 2013, en la URL <http://archive.is/fwFmg> y en <https://sites.google.com/site/elearningchemistry3/ur>.
- Mansilla, D., Muscia, G., Ugliarolo, E., Una fundamentación para la incorporación de la química verde en los currículos de química orgánica, *Educación Química*, **25**(1), 56-59, 2014.
- Mestres, R., Hacia La calidad ambiental a través de la química, *Anales de la Real Sociedad Española de Química*, **3**, 58-65, 2003.
- McKenzie, L., Huffman, L., Hutchison, J., The evolution of a Green Chemistry laboratory experiment: Greener brominations of stilbene, *Journal on Chemical Education*, **82**(2), 306-310, 2005.
- Nudelman, N., *Química Sustentable*. Santa Fe, Argentina: UNL, 2004.
- Onrubia, J. Aprender y enseñar en entornos virtuales: actividad conjunta, ayuda pedagógica y construcción del conocimiento, *RED. Revista de Educación a Distancia*, número monográfico II. 2005. Consultado por última vez en agosto del 2014, en la URL <http://www.um.es/ead/red/M2/>
- Reyes, L., Aporte de la química verde a la construcción de una ciencia socialmente responsable, *Educación Química*, **23**(2), 222-229, 2012.
- Sheldon, R., The E factor: fifteen years on, *Green Chem.*, **9**, 1273-1283, 2007.
- Vucentic, J., Nelson, M., Sustainability: Virtuuous or Vulgar?, *BioScience*, **60**(7), 539-544, 2010.